

# Creació de molècules amb àtoms ultrafreds i làsers ultraràpids

Jordi Mur

Department of Physics and Astronomy

University College London, Gower Street, Londres WC1E 6BT, Anglaterra, Regne Unit

[j.mur@ucl.ac.uk](mailto:j.mur@ucl.ac.uk)

## Resum

Diversos progressos experimentals aconseguits en els darrers anys han permès d'observar cada vegada amb més detall alguns dels processos físics que ocorren a escales atòmiques i moleculars, per a la comprensió dels quals les lleis de la mecànica quàntica són fonamentals. Ara, una nova ruta s'està obrint encaminada al *control* d'aquests processos. En aquest article pretenem donar una introducció en aquest tema centrada en el cas particular de la creació de molècules diatòmiques a partir d'àtoms ultrafreds mitjançant polsos làser ultracurts.

## 1 Introducció

El 1997 Steven Chu, Claude Cohen-Tannoudji i Bill Phillips van rebre el Premi Nobel de Física pel desenvolupament de tècniques de refredament basades en la interacció de llum làser amb núvols d'àtoms alcalins.<sup>1</sup> Es tractava d'un premi certament merescut ja que aquestes tècniques han causat una autèntica revolució en la física atòmica, amb la possibilitat de dur a terme experiments amb una precisió fins abans inassolible en aquest camp de la física. En particular, l'ús del refredament per làser (juntament amb la tècnica de refredament per evaporació) va permetre d'observar per primera vegada, el 1995, la formació d'un condensat de Bose-Einstein d'àtoms neutres. Els investigadors Eric Cornell, Wolfgang Ketterle i Carl Wieman van rebre per aquesta fita el Premi Nobel el 2001.<sup>2</sup> Aquests experiments eren el punt culminant d'una línia de recerca en física atòmica que durava més de quinze anys però, lluny de representar un punt final, la consecució dels primers condensats (més popularment anomenats BEC), per les seves inicials en anglès) ha donat lloc a tota una nova branca de recerca, anomenada *física de gasos freds*, i que es refereix a les investigacions sobre els processos que tenen lloc en núvols d'àtoms a temperatures de l'ordre dels microkelvin o fins i tot per sota (la temperatura típica en un BEC és de l'ordre dels 100 nK =  $10^{-7}$  K).

Des de ben aviat, es va pensar d'utilitzar les mateixes tècniques de refredament per làser per aconseguir mostres fredes i denses de gasos moleculars, per millorar així el coneixement d'aquests sistemes que estan a cavall entre la física i la química. Tanmateix, fins i tot les molècules més simples, les molècules diatòmiques, tenen una estructura

de nivells prou complexa que fa que no sigui gens fàcil de manipular-les amb làsers convencionals, i cal pensar en alguna estratègia més astuta.

Més recentment, el Premi Nobel de Física de 2005 va ser atorgat conjuntament a Roy Glauber, pel desenvolupament de la teoria quàntica de la llum, i a John Hall i Ted Hänsch pel desenvolupament de tècniques d'espectroscòpia de precisió i, en particular, l'anomenada *pinta de freqüències òptiques*, que permet per primera vegada de mesurar freqüències en el rang òptic (THz) de manera absoluta. Amb aquestes tècniques, podem sincronitzar dos rellotges amb un error relatiu entre ells de menys d'una part en  $10^{15}$  o, en altres paraules, podem observar processos que ocorren en escales de temps de l'ordre del femtosegon ( $1 \text{ fs} = 10^{-15} \text{ s}$ ). Aquesta és l'escala de temps típica de certes reaccions químiques, i està ben a prop de l'escala de temps del moviment dels electrons en les seves òrbites al voltant dels nuclis atòmics ( $10^{-18} \text{ s}$ ), que s'espera que es podran observar ben aviat. En aquest context, cal esmentar també els treballs d'Ahmed Zewail en espectroscòpia amb polsos làser femtosegon, que li van merèixer el Premi Nobel de Química de 1999.

Tots aquests avanços ens permeten afirmar que avui en dia disposem d'un alt grau de control sobre el moviment dels àtoms (en particular, dels àtoms alcalins, que tenen una estructura de nivells especialment adequada per ser manipulats amb làsers convencionals), així com de la capacitat per crear polsos de llum amb unes característiques (intensitat, freqüència) ben determinades. És a partir de la unió d'aquestes dues capacitats que esperem ser capaços de crear molècules de manera controlada a temperatures ultrabaixes.

L'interès per aconseguir-ho té diversos orígens. Hi ha motivacions de coneixement fonamental, com ara la comprensió de la dinàmica d'àtoms, electrons i molècules en camps externs intensos tant elèctrics com magnètics. O bé per aprofundir en el coneixement de l'espectroscòpia

<sup>1</sup>Per a informació detallada sobre els diferents premis Nobel que mencionarem, podeu visitar la pàgina web de la Fundació Nobel, <http://www.nobel.se>.

<sup>2</sup>Vegeu l'article commemoratiu [1]. Un article divulgatiu sobre el tema és [2], mentre [3, 4] són dos llibres per a les persones interessades en els detalls tècnics.

de molècules simples però de gran importància per a la modelització de processos en l'atmosfera o el medi interestel·lar. O la investigació sobre la possible variació temporal de les constants fonamentals de la física. També hi ha motivacions més «pràctiques», com per exemple la possibilitat d'implementar certs esquemes de computació quàntica ideats amb molècules polars [5], o el desenvolupament de tècniques de control sobre els processos físics aprofitant el caràcter coherent de l'evolució de la funció d'ona del sistema [6, 7].

## 2 Física molecular bàsica

Abans d'entrar en la discussió sobre els mecanismes proposats per aconseguir disposar de molècules a molt baixes temperatures, volem introduir aquí de manera breu alguns conceptes bàsics de la física molecular que ens han de permetre intuir la dificultat inherent a aquest objectiu i, a la vegada, comprendre les estratègies darrere cada mètode de refredament proposat.

Considerarem el cas de molècula més simple, una molècula diatòmica, i ho farem comparant-lo amb el que sabem de física atòmica i, en particular, el seu exemple bàsic: l'àtom d'hidrogen (vegeu la taula 1). Així com aquest és, en el seu estat fonamental, un sistema amb simetria esfèrica, és clar que una molècula diatòmica presentarà una estructura lineal: l'eix molecular (definit com l'eix que uneix els dos nuclis atòmics) determina un eix de simetria del sistema, com podem observar en la figura 1, on hem representat esquemàticament una molècula  $AB$  i els principals moments angulars dels electrons que ens ajuden a definir-ne l'estat: el moment angular rotacional total  $\mathbf{L}$ , el moment angular de spin total  $\mathbf{S}$  i el moment angular total  $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$ . Els dos primers es defineixen simplement sumant sobre els moments respectius dels electrons del sistema,  $\mathbf{L} = \sum_i \mathbf{l}_i$  i  $\mathbf{S} = \sum_i \mathbf{s}_i$ . (En aquest article, negligirem el paper de l'spin nuclear.)

Quan l'acoblament entre els moments  $\mathbf{L}$  i  $\mathbf{S}$  és petit, les seves projeccions sobre l'eix molecular,  $\Lambda$  i  $\Sigma$ , es poden considerar com a bons nombres quàntics, així com la projecció de  $\mathbf{J}$ ,  $\Omega$ . En aquest cas, els estats quàntics de la molècula es designen de manera molt similar als estats atòmics, mitjançant la notació  $^{2S+1}\Lambda_p^\pm$ . Aquí  $\Lambda \rightarrow \Sigma$  (que no s'ha de confondre amb el nombre quàntic de la projecció de l'spin total) per al cas  $\Lambda = 0$ ,  $\Lambda \rightarrow \Pi$  per  $\Lambda = 1$ , etc. El nombre quàntic  $\sigma = \pm$  ens dona la simetria de la funció d'ona molecular sota la reflexió sobre un pla que contingui l'eix molecular (simetria plana). Finalment, en cas que els dos nuclis siguin iguals, hi ha una simetria central addicional, i cal especificar si la funció d'ona és simètrica  $p = g$  (de l'alemany *gerade*) o antisimètrica  $p = u$  (de l'alemany *ungerade*) sota la reflexió del sistema de coordenades respecte del centre de masses de la molècula.

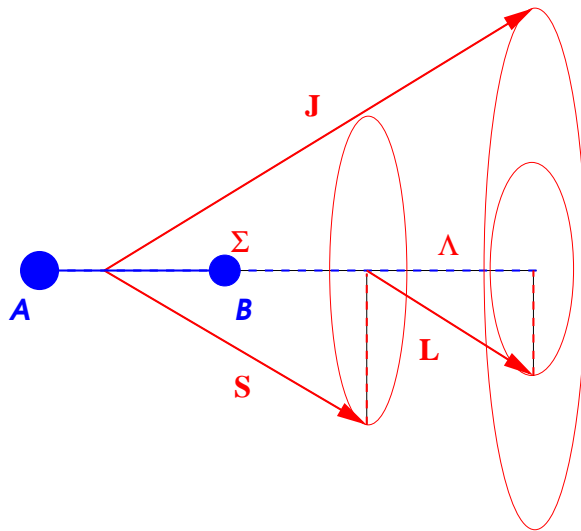


Figura 1: *Moments angulars d'una molècula diatòmica.*  $\mathbf{S}$  és l'spin total,  $\mathbf{L}$  és el moment angular rotacional total,  $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$  és el moment angular total.  $\Sigma$  és la projecció de  $\mathbf{S}$  sobre l'eix molecular, i  $\Lambda$  la projecció de  $\mathbf{L}$ .

Per determinar les energies dels diferents estats possibles de la molècula, cal saber quina és la interacció entre els seus constituents. Així com en el cas de l'àtom d'hidrogen el potencial és ben conegut,  $V(R) = -1/R$  en unitats atòmiques, la situació és més complicada en el cas molecular.<sup>3</sup> Determinar quina és l'energia d'un sistema de  $Z_A + Z_B$  protons i  $Z_A + Z_B$  electrons és feina de la física química i la química teòrica, que solen necessitar importants recursos informàtics per determinar uns quants punts, típicament entre  $3a_0$  i  $20a_0$ , de la corba  $V(R)$  corresponent a cadascun dels estats moleculars. Per fer-ho, és habitual utilitzar l'aproximació de Born-Oppenheimer: tenint en compte que la massa dels nuclis és molt major que la dels electrons, es considera que els nuclis estan fixos a una distància  $R$ , i es calcula l'energia electrostàtica dels electrons que els orbiten. Per al cas d'àtoms amb molts electrons, per exemple el rubidi, se sol considerar que només els electrons de la darrera capa són *actius*, mentre que els altres se suposa que estan «associats» al nucli corresponent, formant un ió de càrrega efectiva  $Z - Q_{\text{actius}}$ . Finalment, caldrà ajustar aquests potencials al comportament asimptòtic  $R \rightarrow \infty$  conegut a partir de primers principis i que, per al cas de l'estat fonamental de molècules formades per àtoms alcalins, és de la forma  $V(R) \approx -C_6/R^6$ .

Aquest comportament de llarga distància, que conver-

<sup>3</sup>Les unitats atòmiques són aquelles en què la càrrega elèctrica del protó val +1, la massa de l'electró és  $m_E = 1$  i  $\hbar = 1$ . En aquestes unitats, la unitat de longitud és el radi de Bohr,  $1a_0 = 0.529177 \times 10^{-10}$  m, i la d'energia és el Hartree,  $1E_H = 4.360 \times 10^{-18}$  J. Una altra unitat habitual d'energia és  $1 \text{ cm}^{-1} = 1.986 \times 10^{-25} \text{ J}/\hbar c$ .

geix cap a zero molt més ràpidament que no ho fa el potencial de Coulomb, canvia de manera important l'estructura de nivells energètics moleculars. A diferència del cas de l'àtom d'hidrogen, on tenim una sèrie infinita d'estats amb energies  $E_n = -1/(2n^2)$ , per al cas molecular només tindrem un conjunt finit d'estats lligats. Per raons històriques, és habitual designar-los com  $E_{vJ}$ , on  $v$  és l'anomenat *nombre quàntic vibracional* i  $J$  és el *nombre quàntic rotacional*. Aquests noms vénen d'un model molt simple (però sorprenentment útil!) de molècula diatòmica, on se suposa que els seus modes d'excitació bàsics són vibracions (és a dir, oscil·lacions de la distància internuclear) i rotacions de l'eix molecular al voltant d'un eix perpendicular (vegeu [8]). En aquest model, l'energia d'un estat ve donada per  $E_{vJ} = \hbar\omega(v + \frac{1}{2}) + B_v J(J+1)$ , on  $\omega$  és la freqüència d'excitació de les vibracions moleculars, i  $B_v$  és la *constant rotacional* corresponent al nivell  $v$ . Per exemple, l'estat molecular fonamental (l'estat de mínima energia) correspon als nombres  $v = 0, J = 0$ . Típicament,  $\hbar\omega \gg B_v$ , de manera que l'espectre de nivells de la molècula està format per una sèrie de «graons» grans de mida  $\hbar\omega$  i, sobreposats a ells, uns altres «graons» més petits de mida  $B_v$ . La determinació experimental dels nivells  $E_{vJ}$  és la feina dels espectroscopistes, mentre que la tasca dels teòrics és construir potencials moleculars  $V(R)$  de tal manera que els seus estats propis tinguin precisament les energies (i els altres nombres quàntics  $\Lambda, S, \sigma$ , etc.) trobades en els experiments. Un exemple de corbes de potencials moleculars determinats mitjançant càlculs *ab initio* es troba en la figura 2.

### 3 Refredament de molècules

Un cop hem descrit les propietats bàsiques que caracteritzen una molècula diatòmica i hem determinat els nombres quàntics que ens en donen els estats, podem plantejar-nos com refredar-les. Veiem que haurem de preocupar-nos de tres graus de llibertat independents:

- el moment lineal  $\mathbf{p}$  del centre de masses de les molècules, el valor mitjà del qual es relacionarà amb

Propietat	Àtom d'hidrogen	Molècula diatòmica
Simetria	esfèrica	axial
Potencial d'interacció	$V(R) = -1/R$	numèric
Nivells energètics	$E_n = -1/(2n^2)$	$E_{vJ}$

Taula 1: Comparació entre algunes propietats que coneixem bé en física atòmica i no tan bé per a molècules diatòmiques: energia potencial en funció de la distància  $R$  entre els elements constitutius, nivells energètics, i simetria del problema. Les energies i distàncies estan expressades en unitats atòmiques

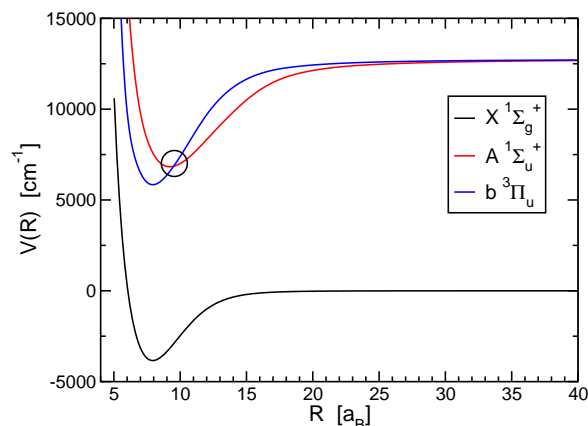


Figura 2: Potencials moleculars per al cas de la molècula  $^{85}\text{Rb}_2$  en els estats  $X \ ^1\Sigma_g^+$  (estat electrònic fonamental, línia negra),  $A \ ^1\Sigma_u^+$  (primer estat singlet excitat, línia vermella) i  $b \ ^3\Pi_u$  (línia verda). El límit de dissociació dels potencials A i b correspon a dos àtoms lliures en els estats atòmics  $5S$  i  $5P$ , respectivament, el qual està  $12737.36 \text{ cm}^{-1}$  per damunt del límit de dissociació de l'estat X, que correspon a dos àtoms de rubidi en el seu estat fonamental  $5S$ . El cercle ens indica una zona on es creuen dues corbes de potencial i on l'aproximació de Born-Oppenheimer no serà bona

la temperatura  $T$  del gas de molècules per  $\langle p^2 \rangle = 3mk_B T$ , on  $m$  és la massa d'una molècula i  $k_B = 1,38 \times 10^{-23} \text{ J-s}$  és la constant de Boltzmann;

- l'energia vibracional interna,  $E_{\text{vib}} = \hbar\omega(v + 1/2)$  per cada molècula en l'estat vibracional  $v$ ;
- l'energia rotacional interna,  $E_{\text{rot}} = B_v J(J+1)$  per cada molècula en l'estat  $|vJ\rangle$ .

Així doncs, si volem un condensat de Bose-Einstein de molècules en el seu estat fonamental, haurem de preocupar-nos de reduir la temperatura del gas, així com l'energia interna de les molècules. Per aconseguir-ho, s'han considerat moltes possibles rutes, cadascuna de les quals té els seus avantatges i inconvenients. En general, les podem classificar en dos grans grups: les que es preocupen, en un primer moment, de reduir l'energia interna, i després l'energia tèrmica o de translació, i les que segueixen el camí contrari. Aquí anomenarem la primera estratègia *refredament per la via molecular* i la segona, *refredament per la via atòmica*.

#### 3.1 Refredament per la via molecular

En aquest cas, cal ocupar-se primerament de reduir l'energia interna de les molècules, és a dir, procurar que totes estiguin a l'estat  $|vJ\rangle = |00\rangle$  i, després, reduir-ne la velocitat mitjana. Un exemple d'aquesta estratègia consisteix

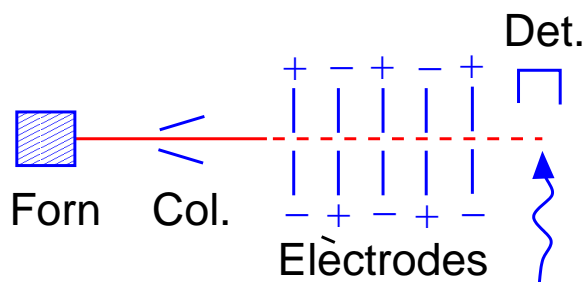


Figura 3: *Desaccelerador molecular: un feix molecular col·limat és injectat a una successió d'elèctrodes, el camp elèctric dels quals es pot modificar en el temps, fent que les molècules perdin energia a mesura que travessen el desaccelerador. L'estat final de les molècules es determina per espectroscòpia làser*

a començar amb un *feix molecular*, que és un feix de molècules que surten d'un forn i que es fan passar per un col·limador, cosa que fa que totes tinguin una velocitat de translació molt similar. La temperatura del forn no és prou alta per poblar molts estats rovibracionals de les molècules, i de fet sovint es pot considerar que, un cop el feix està ben col·limat, totes es troben ja en l'estat intern fonamental. La feina que resta és, doncs, reduir-ne la velocitat mitjana.

Un mètode que ha estat dut a la pràctica amb èxit consisteix a fer passar les molècules per una successió d'elèctrodes, el camp elèctric dels quals pot ser modificat en funció del temps. Les molècules que tenen un moment dipolar elèctric permanent (com ara CO, NO, OH, RbCs o LiNa) canvien la seva energia en travessar un gradient de camp elèctric. Així, dissenyant amb cura la seqüència temporal de camp que cal aplicar a cada elèctrode, és possible fer que el gruix del feix molecular sempre es trobi «pujant el pendent» del potencial i, per tant, perdent energia: el feix veurà reduïda la seva velocitat de translació o, el que és el mateix, la seva temperatura (vegeu la figura 3). En el fons, el funcionament d'aquests «desacceleradors» és el mateix que el d'un accelerador de partícules, només que aquí l'acceleració que es dona a les molècules és negativa [9].

Un dels avantatges d'aquest tipus de refredament és que, al final del desaccelerador, les molècules surten amb una velocitat que es pot controlar bé experimentalment. Si disposem de dos desacceleradors (per la mateixa molècula o per molècules diferents) de manera que els feixos desaccelerats es creuin, podem estudiar propietats de col·lisió entre les molècules així com la seva dependència en l'energia de col·lisió, amb una gran resolució.

### 3.2 Refredament per la via atòmica

La ruta alternativa tracta d'aconseguir primer una bona quantitat d'àtoms freds, i unir-los llavors en molècules

amb la menor energia interna possible. Per obtenir àtoms freds, ja sabem que les estratègies de refredament amb làser, i, si volem, refredament per evaporació, són eficaces. El problema que sorgeix és transformar una parella d'àtoms que estan molt distants (a causa de les densitats atòmiques molt baixes típiques dels experiments, uns  $10^{10} - 10^{14}$  àtoms per  $\text{cm}^3$ ) i que xoquen amb una velocitat relativa molt petita (ja que estan molt freds) en una molècula en un estat amb poca energia interna, que es caracteritza per una distància entre els àtoms constituents molt petita. Aquest fet està il·lustrat en la figura 4, on podem veure una funció d'ona de col·lisió, que s'estén fins a l'infinit, i dues funcions d'ona corresponents a estats lligats de la molècula excitada. La diferència d'extensió de les dues és palesa.

Un mecanisme ben conegut per unir dos àtoms en una molècula és la *fotoassociació*, que consisteix a il·luminar els àtoms amb un làser amb la freqüència  $\nu$  adequada perquè l'estat de col·lisió inicial tingui la mateixa energia que un estat lligat d'un potencial excitat (vegeu la figura 4). Aquest tipus de transicions entre estats de diferents potencials estan regides pel principi de Franck-Condon, segons el qual la probabilitat de transferència de l'estat inicial de col·lisió  $|\phi_{\text{col}}\rangle$  del potencial fonamental a l'estat lligat  $|\phi_{\nu'}\rangle$  del potencial excitat és proporcional a  $|\langle\phi_{\nu'}|\phi_{\text{col}}\rangle|^2$  [8]. Observant la figura 4, podem intuir que la probabilitat serà major per als estats lligats més excitats, ja que la seva probabilitat de presència és major a llarga distància, on també  $\phi_{\text{col}}$  és més gran. De fet, per als estats més excitats, la probabilitat de presència està tan concentrada al punt de retorn clàssic en el seu potencial que la probabilitat de fotoassociació és proporcional, simplement, a  $f(R_I) = |\phi_{\nu'}^*(R_I)\phi_{\text{col}}(R_I)|^2$ , on  $R_I$  és el punt en què el potencial excitat es creua amb  $V_{\text{fon}}(R) + h\nu$ . Posteriorment, l'estat excitat decau espontàniament amb una vida mitjana de l'ordre dels nanosegons ( $1 \text{ ns} = 10^{-9} \text{ s}$ ). Això pot donar lloc novament a àtoms en estats de col·lisió (el més probable), o a una molècula en un estat rovibracional lligat del potencial fonamental, com volem.

Aquest procés s'ha pogut observar experimentalment. Ja el 1998 es va detectar la formació de molècules en un gas diluït de  $^{133}\text{Cs}$ , per fotoassociació amb els làsers que formaven la mateixa trampa que contenia els àtoms. Tanmateix, el ritme de producció que s'assoleix amb aquest mètode és molt baix, a causa de la baixa densitat dels gasos i del petit valor de la funció de recobriment  $f(R_I)$ , així com per la curta vida mitjana típica dels estats excitats. Cal pensar, doncs, en algun mecanisme d'optimització de la fotoassociació. Una opció que està rebent força atenció per part d'investigadors teòrics i també experimentals és utilitzar els principis de la teoria del control coherent dels processos quàntics [2, 3], en particular mitjançant l'ús de

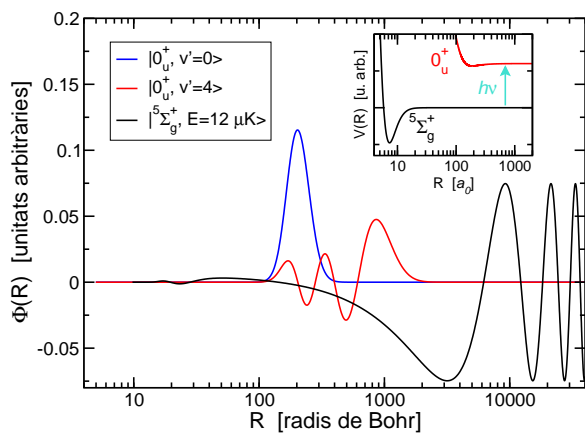


Figura 4: Funcions d'ona corresponents als estats lligats vibracionals  $v' = 0$  (línia blava) i  $v' = 4$  (línia vermella) pel potencial d'interacció  $0_u^+$  de  $^4\text{He}_2$ , així com un estat de col·lisió de l'heli metastable  $\text{He}^*$  en el potencial  $5\Sigma_g^+$  (línia negra). La figura inserida mostra els potencials corresponents. Observeu com el potencial excitat té el mínim a una gran distància internuclear, cosa que determina la posició del màxim de  $\phi_{v'=0}(R)$ . Podem transferir població de l'estat de col·lisió de  $5\Sigma_g^+$  als estats lligats de  $0_u^+$  amb fotons de freqüència  $\nu \simeq 277 \text{ THz}$ . Noteu l'escala logarítmica a les absisses de les dues gràfiques

polsos làser ultracurts per al procés de fotoassociació.

La idea bàsica és que un pols de durada finita  $\tau$  té una amplada espectral  $\delta\omega = 14,7 \text{ cm}^{-1}/\tau$ , si  $\tau$  ve donat en picosegons ( $1 \text{ ps} = 10^{-12} \text{ s}$ ). Per tant, un pols amb una durada d'entre 0,1 i 100 ps poblarà diversos nivells rovibracionals del potencial excitat sense veure's afectat per la seva vida mitjana finita. Manipulant adequadament l'amplitud i la fase de cadascuna de les components espectrals del pols, ha de ser possible controlar l'evolució del paquet d'ones que es transfereix al potencial excitat i, d'aquesta manera, la seva probabilitat de decaure en estats lligats del potencial fonamental.

En aquest context, una estratègia de control és imposar (fent que el pols làser travessi un medi no-lineal) una variació de la fase  $\varphi$  del camp que forma el pols, de manera que la freqüència a cada instant sigui

$$\omega(t) = \frac{d\varphi}{dt} = \omega_l + (t - t_0)\chi. \quad (1)$$

Un pols amb una variació temporal de la freqüència s'anomena *pols xirpat*, de l'anglès *chirp* («refilet»), per analogia entre aquesta freqüència que varia en el temps i el refilet d'un ocell cantaire.

D'acord amb l'equació (1), per  $\chi < 0$  el pols primer conté les freqüències majors, que transfereixen població als estats rovibracionals més propers a la dissociació de l'estat excitat, els quals tenen un període de vibració en

el seu potencial més llarg. Posteriorment es transferirà població als estats més lligats i de menor extensió espacial. Si considerem un pols estàndard amb una envoltent gaussiana per a la seva intensitat, de manera que a la pràctica només siguin rellevants les freqüències  $\omega(t)$  de la finestra  $t \in [t_0 - \tau/2, t_0 + \tau/2]$ , veiem que escollint adequadament el ritme de *chirp*  $\chi$  i la durada del pols  $\tau$  podem exercir un control ben definit sobre el conjunt de nivells  $|v'\rangle$  de l'estat excitat que pobleu, per quin ordre ho fem (segons si  $\chi < 0$  o  $\chi > 0$ ) i amb quin retard els uns respecte als altres (segons la magnitud de  $\chi$ ).

Els primers experiments per demostrar la possibilitat d'augmentar el ritme de producció de molècules mitjançant polsos ultracurts s'han dut a terme recentment amb gasos de rubidi, i els resultats són esperançadors, ja que mostren que és possible exercir un control sobre el resultat de la fotoassociació mitjançant l'ús de polsos ultracurts. En particular, per polsos en els quals la freqüència de cada component espectral varia d'acord amb l'equació (1) s'ha demostrat que un paràmetre determinant és el ritme de *chirp*  $\chi$ . Més concretament, per  $\chi > 0$  la producció de molècules *disminueix* respecte del cas sense *chirp* ( $\chi = 0$ ) [10]. Això demostra que un disseny adequat dels paràmetres del pols ( $\omega_l$ ,  $\chi$ , intensitat, etc.) permet exercir efectivament un control sobre el resultat de l'experiment. Val a dir, tanmateix, que els experiments es duen a terme amb polsos de durada inferior al picosegon, cosa que fa difícil determinar *a priori* com cal modificar-los per augmentar-ne l'eficiència, i cal dur a terme un intens treball numèric de modelització de cada experiència.

Efectivament, cal tenir en compte que no és el mateix un pols amb una amplada espectral d'uns quants  $\text{cm}^{-1}$  (que poblarà potser una vintena de nivells rovibracionals per al cas de  $\text{Rb}_2$ ), que un pols amb una durada inferior al picosegon (que pobla un bon centenar de nivells, cadascun amb una energia i una dependència temporal diferents). Així, veiem que per saber quin és el pols que ens farà la feina, cal tenir un molt bon coneixement dels estats moleculars que entren en joc i dels seus potencials d'interacció. També és important tenir en compte els seus acoblaments amb estats veïns. Per exemple, un creuament com el que es mostra en la figura 2 pot donar lloc a efectes de dependència amb el temps notables, els quals no es poden negligir.

Finalment, remarcuem que també es podrà aplicar un pols ultracurt pel decaïment induït vers un estat lligat concret del potencial fonamental, i així mantenir en tot el procés la coherència de l'estat inicial. Això és especialment important si volem arribar a tenir un condensat de Bose-Einstein de molècules en l'estat rovibracional fonamental a partir d'un condensat atòmic. A més, aquest procediment té l'avantatge que, si bé en cada cicle d'*excitació-desexcitació* només es transfereix una petita



part de l'estat de col·lisió inicial, si sumem molts cicles de manera coherent, s'ha calculat que és possible transmetre amb fidelitat l'estat inicial a un estat rovibracional profund concret del potencial fonamental.

#### 4 Discussió i conclusions

En els darrers anys, els desenvolupaments en la tecnologia làser han permès una major comprensió de la física atòmica de baixes temperatures. En aquest article he esbossat algunes idees per a l'aplicació d'aquestes tècniques també a la física molecular. En particular, he mostrat com la unió del coneixement teòric adquirit en el marc de la teoria del control coherent pot ser útil per a l'optimització de la producció de molècules diatòmiques fredes per fotoassociació amb polsos làser ultracurts. Hi ha també altres estratègies que estan rebent atenció, com ara la fotoassociació amb làsers continus en xarxes òptiques, o també mitjançant l'ús de les anomenades *ressonàncies de Feshbach*. Cada procediment té els seus avantatges i inconvenients, i d'alguna manera la «competència» entre uns i altres fa aquest camp de recerca encara més estimulant, a l'espera de veure qui és el primer que assoleix l'objectiu de crear en grans quantitats molècules fredes.

A l'hora de triar quina de les dues vies mencionades és millor cal preguntar-se què volem fer en acabat amb les molècules formades. Per exemple, l'ús del «desaccelerador molecular» dona lloc a mostres molt diluïdes, si bé amb una velocitat ben definida i ajustable. És per tant una eina ideal per estudiar com depenen de l'energia de col·lisió propietats com ara les seccions eficaces elàstiques i inelàstiques (per a la producció de nous compostos).

D'altra banda, la fotoassociació d'un gas atòmic ultrafred genera mostres moleculars més denses i que estan en repòs en el referencial del laboratori. Aquests sistemes poden ser útils per a un estudi d'alta precisió de l'espectroscòpia de les molècules implicades. Així mateix, seria possible aplicar en aquests gasos moleculars una xarxa òptica (un reticle periòdic perfecte format per interferència de feixos de llum làser) i usar-los per estudiar models de la física de la matèria condensada, tal com ja es fa amb gasos atòmics [11]. Una xarxa òptica «carregada» amb molècules polars també es pot fer servir per a computació quàntica. No hi ha dubte, per tant, que totes les tècniques tindran la seva oportunitat de contribuir per assolir un coneixement profund de la física que aquests sistemes contenen.

#### Agraïments

Vull agrair les converses i discussions mantingudes amb tots els col·legues del Laboratoire Aimé Cotton, i en particular amb Françoise Masnou, durant la meua estada. Així mateix, agraeixo el suport rebut de la xarxa europea Cold Molecules, l'Institut Francilien de Recherche sur les Atomes Froids (IFRAF) i l'Engineering and Physical Sciences Research Council (EPSRC).

#### Bibliografia

- [1] PÉREZ-MADRID, A. i RUBÍ, J. M., La condensació de Bose-Einstein. Premi Nobel 2001, *Revista de Física*, 3(2), 34–38 (2002).
- [2] MUR, J., Aparellaments ultrafreds, *Avui*, 12 març 2005.
- [3] PETHICK, C. J. i SMITH, H., *Bose-Einstein Condensation in dilute gases*, Cambridge University Press (Cambridge, 2001).
- [4] PITAEVSKII, L. P. i STRINGARI, S., *Bose-Einstein condensation*, Oxford University Press (Oxford, 2003).
- [5] DEMILLE, D., Quantum computation with trapped polar molecules, *Physical Review Letters*, 88, 067901 (2002).
- [6] RABITZ, H., DE VIVIE-RIEDLE, R., MOTZKUS, M. i KOMPA, K., Wither the future of controlling quantum phenomena?, *Science*, 288, 824–828 (2000).
- [7] SHAPIRO, M. i BRUMER, P., *Principles of the quantum control of atomic and molecular processes*, Wiley (Nova York, 2003).
- [8] HERZBERG, G., *Molecular spectra and molecular structure*, Van Nostrand (Nova York, 1950).
- [9] BETHLEM, H. L., BERDEN, G. i MEIJER, G., Decelerating neutral dipolar molecules, *Physical Review Letters*, 83, 1558–1561 (1999).
- [10] BROWN, B. L., DICKS, A. J. i WALMSLEY, I. A., Coherent control of ultracold molecule dynamics in a magneto-optical trap by use of chirped femtosecond laser pulses, *Physical Review Letters*, 96, 173002 (2006).
- [11] LEWENSTEIN, M., SANPERA, A., AHUFINGER, V., B., SEN, A. i SEN, U., Ultracold atomic gases in optical lattices: mimicking condensed matter physics and beyond, *Advances in Physics*, 56, 243–379 (2007).